

# ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ПРИМЕСНЫМИ АТОМАМИ НА РАСТВОРИМОСТЬ ГАЗОВ В КРИСТАЛЛАХ

Бородин К.И.<sup>\*</sup>, Волков В.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России  
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [bkimm@mail.ru](mailto:bkimm@mail.ru)

## INFLUENCE OF INTERACTION BETWEEN IMPURITY ATOMS ON SOLUBILITY OF GASES IN CRYSTALS

Borodin K.I., Volkov V.A.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Solubility of gases in crystals is calculated taking into account interaction between impurity atoms. The dependence of solubility on gas pressure for monatomic and diatomic gases is established.

Обычно в расчетах растворимости атомов внедрения в кристаллах пренебрегают их взаимодействием между собой [1]. Однако во многих случаях данное взаимодействие играет определяющую роль: именно оно обуславливает дальнейшее упорядочение в системе межузельные атомы – межузельные вакансии, распад твердых растворов внедрения и т.п. [2]. Поэтому представляет интерес оценка влияния этого взаимодействия на растворимость газов в кристаллах.

В данной работе рассчитана растворимость газа в кристалле с оцк-решеткой. Предполагается, что поглощенные атомы газа занимают октаэдрические и тетраэдрические междоузлия. Запишем свободную энергию системы растворитель (кристалл) и донор (газ) в виде

$$F = -u_o N_o - u_T N_T - 2\nu_1 \frac{N_o^2}{N} - 2\nu_2 \frac{N_T^2}{N} - 2\nu_3 \frac{N_o N_T}{N} + \quad (i)$$

$$+ kT \{ N_o \ln N_o + (N - N_o) \ln (N - N_o) + N_T \ln N_T + (2N - N_T) \ln (2N - N_T) \} + F_G,$$

где  $u_o$  и  $u_T$  - взятые со знаком минус энергии внедренных атомов в окта и тетра междоузлиях;  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  - энергии взаимодействия растворенных атомов ближайших соседей на окта, тетра и окта-тетра междоузлиях, взятые с обратным знаком;  $N$  - число окта междоузлий в кристалле;  $N_o, N_T$  - числа внедренных в окта и тетра междоузлия атомов газа;  $F_G$  - свободная энергия одноатомного или двухатомного газа (см. [3]).

Равновесные значения  $N_o$  и  $N_T$  находятся из условий экстремальности свободной энергии  $F$  [4]

$$\frac{\partial F}{\partial N_o} = 0, \frac{\partial F}{\partial N_T} = 0 \quad (ii)$$

которые приводят к уравнениям для концентраций внедренных атомов  $c_o = N_o/N$ ,  $c_T = N_T/2N$ . Последние решаются методом итераций по параметру  $\alpha = 4\nu_1/kT$ .

Определим растворимость  $R$  как концентрацию растворенных атомов по отношению к полному числу междоузлий кристалла

$$R = \frac{N_o + N_T}{3N} = \frac{1}{3}c_o + \frac{2}{3}c_T. \quad (\text{iii})$$

Эффект влияния взаимодействия между примесями проявляется уже в первом порядке по параметру  $\alpha$ , при  $\nu_3 > 0$  растворимость увеличивается, а при  $\nu_3 < 0$  - уменьшается.

Анализ полученных уравнений показывает, что за счет взаимодействия поглощенных атомов меняется зависимость растворимости от давления газа  $p$ . Если пренебречь этим взаимодействием, то

$$R = \beta \cdot p^{\frac{1}{\nu}}, \quad (\text{iv})$$

при учете указанного взаимодействия

$$R = \beta \cdot p^{\frac{1}{\nu}} + \gamma \cdot p^{\frac{2}{\nu}}, \quad (\text{v})$$

где  $\beta$  и  $\gamma$  - параметры, причем  $\gamma \sim \nu_3$ ,  $\nu = 1$  для одноатомного газа и  $\nu = 2$  для двухатомного газа.

Экспериментально установлено, что во многих случаях для растворимости хорошо выполняется закон Сивертса  $R \sim \sqrt{p}$ . Однако имеются случаи отклонения от этого закона. Так растворимость водорода в палладии описывается нелинейной зависимостью от  $\sqrt{p}$  (см. [5], гл.8), что может быть объяснено влиянием взаимодействия между примесными атомами.

1. Матысина З.А., ФММ, 117, 673 (2016).
2. Смирнов А.А., Теория сплавов внедрения, Наука (1979).
3. Кубо Р., Статистическая механика, Мир (1967).
4. Волков В.А., Машаров Г.С., Машаров С.И., ЖТФ, 74, 31 (2004).
5. Водород в металлах. Прикладные аспекты, Т.2, Мир (1981).